

## 1 入力ファイルフォーマット

入力ファイルはセクションをつなげたものである。

---

セクション a  
セクション b  
セクション c  
...

---

セクションは#で始まりセクションの名前が続く行で開始され、次のセクションの始まりの前で終了する。

---

# セクション名  
...

---

プログラムによって必要なセクションは異なる。セクションを並べる順番は任意である。

入力はセクションごとに rewind されながら読み込まれるため、必ずファイルにしておく必要がある。rewind できない標準入力から読み取ることは出来ない。

セクション内部のデータは fortran の namelist 入力とその他のデータからなっている。namelist 入力においては、入力しないパラメタは省略でき、またパラメタの指定の順番は任意である。

なお、単位は断りがない限り原子単位系である。

また、namelist 中の文字列を引用符でくくらないとならない処理系があるので注意が必要である。gfortran はそのような例である。

## 2 file map data セクション

オプションのセクションである。このオプションのセクションを設定すると、プログラムが出力するファイルが `fortran` の事前接続されたファイルにはならず、その名前がここで指定する `basename` とそれぞれの内容に対応する拡張子をつないだものとなるファイルになる。この拡張子は、`programs.tex` の方で定義しているである。

---

```
# file map data
&filemap
  basename =
  number_PP_file =
  /
potnam(1) rhinam(1)
potnam(2) rhinam(2)
...
potnam(number_PP_file) rhinam(number_PP_file)
```

---

名前の内容は

---

name	comment
basename	出力ファイルの基幹部
number_PP_file	擬ポテンシャルファイルの数
potnam(*)	*番の擬ポテンシャルファイルの名前
rhinam(*)	*番の原子電荷データファイルの名前 (省略可能)

---

である。原子電荷データファイルを使用しない場合には省略すれば良い。

### 3 main data セクション

必須のセクションである。

---

```
# main data
&tappinput
...
/
```

---

namelist tappinput の内容は

---

```
lattice_factor,
lattice_list,
number_spin,
number_component,
number_density,
spin_mode,
cutoff_local_potential,
cutoff_wave_function,
cutoff_uspp_q,
xtrap_beta,
cutoff_btp_a,
cutoff_btp_gc,
cutoff_btp_sigma,
number_element,
number_atom,
number_band,
extra_charge,
diff_spin,
elec_kbt,
number_xtrap_stage,
initial_wfn,
initial_lpt,
store_wfn,
chain_calc,
scf_converge,
scf_converge_energy,
scf_number_iter_1st,
scf_number_iter,
davidson_flag,
davidson_number_diag_1st,
davidson_number_diag,
control_uptime,
cutoff_bspl_fit,
control_q_han_win_fac,
```

```

control_nbsf,
xc_type,
cutoff_exch_att_rc,
cutoff_exch_att_rd,
scf_threshold_hybrid,
scf_threshold_noncol,
noncol_spin_axis,
compat_old_squ_norm,
aux_eng_type,
precond_thr,
precond_beta,
cutoff_precond

```

名前の内容は

	name	comment
	lattice_factor	セルの典型的な長さ。a.u. 単位。
	lattice_list	セルの基本並進ベクトル $aa(:,1), aa(:,2), aa(:,3)$ の順に数値を並べる。lattice_factor 単位。
a	number_spin	スピン自由度、厳密には分離されて扱われるスピン成分の数。1: LDA、2: LSDA。デフォルトは LDA。
a	number_component	波動関数の成分の数。1: Schrödinger、2: Pauli。デフォルトは Schrödinger。2 の場合、number_spin は 1 でなければならない。
a	number_density	電荷・スピン偏極密度 (ベクトル) の成分数。1: スピン偏極密度は 0、4: スピン偏極密度は 0 ではない (non-collinear)。4 の場合、number_component は 2 でなければならない。デフォルトは collinear。
d	spin_mode	全スピン偏極をの固定条件。LSDA のときに有効。1: diff_spin で固定。2: 自由。
a	cutoff_local_potential	local potential を展開する平面波のカットオフ波数
	cutoff_wave_function	波動関数を展開する平面波のカットオフ波数
a	cutoff_uspp_q	USPP の $Q(r)$ を展開する平面波のカットオフ波数
a	xtrap_beta	Anderson extrapolation の混合パラメータ
d	cutoff_btp_a	BTP[1] による運動エネルギー補正のパラメータ $A$ 。 $A > 0$ で補正が有効化。デフォルトでは無効。
d	cutoff_btp_gc	BTP による運動エネルギー補正のパラメータ $G_c$ 。 $G_c < \text{cutoff\_wave\_function}$ であること。
d	cutoff_btp_sigma	BTP による運動エネルギー補正のパラメータ $\sigma$ 。 $\sigma > 0$ であること。
	number_element	元素数
	number_atom	原子数
	number_band	バンド数
d	extra_charge	中性状態から系に加える電荷量。デフォルトで 0。
d	diff_spin	spin_mode = 1 で有効となる全スピン偏極の固定値。デフォルトで 0。

name	comment
d elec_kbt	電子系の設定温度 (エネルギー単位)。Fermi 面の smearing モードで解釈が異なる。デフォルトでは 0。
a number_xtrap_stage	Anderson extrapolation の段数。10 以下を指定すると、収束しなければ自動的に xtrap_beta が 1/2 ずつ減速される。10 を越える場合、実際の段数はこれから 10 を引いたものとなりまた xtrap_beta は減速されない。
d initial_wfn	初期波動関数。0*: ランダム。1: ファイルからロード。
d initial_lpt	初期 local potential。0*: ion 由来。1: ファイルからロード。2: 原子電荷分布由来。
d store_wfn	0: 波動関数は終了後破棄。1: 波動関数をストア
d chain_calc	0: 計算は最初から。1: 既存データから計算を継続する。2: 既存データから SCF 収束だけを継続する (cgmrpt)。計算を継続する場合、波動関数とローカルポテンシャルも入力しなければならない。3: cgmrpt で構造最適化した結果を引き継ぐ (vbpef, vbstm, wfn2chg, pefcos, wannier で有効)。
a scf_converge	SCF の収束条件。local potential の収束度。
a scf_converge_energy	SCF の収束条件。全エネルギーの収束度。
scf_number_iter_1st	SCF の繰り返し回数の上限。初回用。SCF が収束していなくてもこの回数で打ちきられて力の計算など次のステップへ進んでしまうので注意すること。100 以上の値を使うことは通常ない。
scf_number_iter	SCF の繰り返し回数の上限。SCF が収束していなくてもこの回数で打ちきられて力の計算など次のステップへ進んでしまうので注意すること。100 以上の値を使うことは通常ない。
a davidson_flag	Davidson 法の減次のためのフラグ。デフォルトを使うなら -1 をセット。正の整数なら、 $10.0^{**}(-\text{davidson\_flag}/10.0)$ に減次のしきい値が設定される。
a davidson_number_diag_1st	Davidson 法の繰り返し回数。初回用。収束している波動関数のみを読み込んで、local potential を読み込まない場合は、これを 0 に設定することで初回の対角化をバイパスさせて、読み込んだ波動関数を保持させ、そこから local potential を構成させる。
a davidson_number_diag	Davidson 法の繰り返し回数。
control_uptime	計算時間の上限 [s]。
a cutoff_bspl_fit	擬ポテンシャルデータを B spline fit する上限。
d control_q_han_win_fac	USPP の $Q(r)$ をハニング窓処理する際のカットオフ。cutoff_wave_function 単位。負の値で機能は無効化。2.0 以上であること。真空中に染み出してくる $Q(r)$ の振動成分を抑制するために使う。仕事関数の計算を行う際は必要。
a control_nbsf	擬ポテンシャルデータを B spline fit する際のメッシュ数
a xc_type	交換相関ポテンシャルのタイプ。デフォルトは PBE
a cutoff_exch_att_rc	exchange 計算に用いる attenuation の cutoff $R_c$ 。デフォルトよりも少し小さい値が良いバンドを与えることがあるので注意。パラメタの詳細は formalism.tex を参照。

name	comment
a cutoff_exch_att_rd	exchange 計算に用いる attenuation の cutoff $R_d$ デフォルトよりも少し小さい値が良いバンドを与えることがあるので注意。パラメタの詳細は formalism.tex を参照。
a scf_threshold_hybrid	hybrid 汎関数に切り替える際の収束度のしきい値。100.0 以上を指定すると、波動関数とローカルポテンシャルを読み込んでいない場合でも最初から hybrid 汎関数で計算を行う。
a scf_threshold_noncol	non-collinear 計算の場合であって、noncol_spin_axis を指定していない場合、ポテンシャルの縦成分の収束しきい値は scf_converge と scf_threshold_noncol の積となる。この値を小さくするとそれだけ縦成分を強く収束させてから全体の収束を行うようになる。小さい方が全体の収束を安定化するが小さすぎると計算時間が無駄になる。
d noncol_spin_axis	カーテシアン座標 3 成分を指定できる。ただし大きさは自動的に規格化されるので意味を持たない。デフォルトでゼロベクトルとなっており、この場合には局所スピンベクトル密度の絶対値でスピン分極度が計算される。このベクトルがゼロでない場合、局所スピンベクトル密度のこの方向への射影が代わりに局所的なスピン分極度となる。colliner になる系で用いると SCF の収束が良くなる。
d compat_old_squ_norm	TAPP-3.0 で使われていた古い SCF 収束度の解釈を使う場合、1、使わなければ、0*。
d aux_eng_type	DFT のエネルギーに加えて補助的なエネルギーを使う場合、そのタイプを指定する。NONE: なし、DFTD2: DFT-D2[2], S. Grimme のコードによる DFT-D3 と DFT-D2[3,4]: DFTD3_SG と DFTD2_SG。デフォルトは NONE。DFT-D2 は対応した交換相関汎関数と組み合わせて使用していない場合、無効になる。DFT-D3(S. Grimme) に対応していない交換相関汎関数を組み合わせた場合、エラーになる。DFT-D2 は、zero damping を、DFT-D3 は Becke-Johnson damping を使用する。
d precondition_thr	局所ポテンシャルの収束を加速する前処理機能 [5] が有効になる SCF 収束度を指定する。指定していないか負の場合この機能は無効となる。1000 以上を指定すると常に有効となる。この機能が有効である場合、elec_kbt > 0 でなければならない。
d precondition_beta	局所ポテンシャルの収束を加速する前処理機能が有効である場合に使われる xtrap_beta の値を指定する。
d cutoff_precond	トーマス・フェルミ近似に基づいて局所ポテンシャルの収束を加速する前処理機能において用いられるハニング窓のカットオフを指定する。フェルミ面での状態密度は cutoff_precond(3) から cutoff_precond(4) まででなめらかにカットオフ、局所ポテンシャルの前処理は cutoff_precond(1) から cutoff_precond(2) まででなめらかにカットオフされる。

である。先頭に a がついているものは設定しなければ自動的に値がセットされる。d がついているものは設定しなければデフォルトで機能が無効になる。( 機能を無効にする選択肢に \* をつけている。)

なお、単位胞を表す基本格子ベクトル  $\mathbf{a}_i$  の成分は、

$$\begin{aligned} a_{i,x} &= \mathbf{ax} \times \mathbf{aa}(1,i) \\ a_{i,y} &= \mathbf{ax} \times \mathbf{aa}(2,i) \\ a_{i,z} &= \mathbf{ax} \times \mathbf{aa}(3,i) \end{aligned}$$

で与えられる。

また、有効な xc\_type は

xc_type	comment	DFT-D2	DFT-D3 (SG)
PBE		有効	有効
PBEsol			有効
PW91			
CAPZ	Ceperley Alder Perdew Zunger		
LDAPW92	PBE の LDA 部分		
HF	Hartree Fock		有効
PBE0		有効	有効
B3LYP	テスト必要	有効	有効

である。

旧形式の入力ファイルとの名前新旧対応は、

old name	new name	comment
ax	lattice_factor	
aa	lattice_list	aa(:,1),aa(:,2),aa(:,3) = lattice_list(1:9)
nspin	number_spin	
ismode	spin_mode	
qf	cutoff_local_potential	
qm	cutoff_wave_function	
qc	cutoff_uspp_q	
beta	xtrap_beta	
qbtp(1)	cutoff_btp_a	
qbtp(2)	cutoff_btp_gc	
qbtp(3)	cutoff_btp_sigma	
nkd	number_element	
nsi	number_atom	
nw	number_band	
znext	extra_charge	
dspin	diff_spin	
ekbt	elec_kbt	
iopt(1)	number_xtrap_stage	
iopt(2)	initial_wfn	
iopt(3)	initial_lpt	
iopt(4)	store_wfn	
iopt(5)	chain_calc	

old name	new name	comment
iopt(6)	precond_thr, pre- cond_beta, cutoff_precond	
eps	scf_converge	
ee psa	scf_converge_energy	
niter0	scf_number_iter_1st	
niter1	scf_number_iter	
itsb	davidson_flag	
ndiag0	davidson_number_diag_1st	
ndiag1	davidson_number_diag	
uptime	control_uptime	
qbsf	cutoff_bspl_fit	
fwqcom	control_q_han_win_fac	
nbsf	control_nbsf	
xctp	xc_type	
rc	cutoff_exch_att_rc	exchange 計算に用いる attenuation の cutoff
rd	cutoff_exch_att_rd	exchange 計算に用いる attenuation の cutoff
thr_hybrid	scf_threshold_hybrid	hybrid 汎関数に切り替える際の収束度のしきい値

である。

#### 参考

- [1]: M. Bernasconi et al., J. Phys. Chem. Solids **36** 501-505 (1995).
- [2]: S. Grimme, J. Comput. Chem. **27** (15) 1787-1799 (2006).
- [3]: S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich and H. Krieg, J. Chem. Phys, **132** 154104 (2010).
- [4]: S. Grimme, S. Ehrlich and L. Goerigk, J. Comput. Chem, **32** 1456-1465 (2011).
- [5]: Y. Yoshimoto and S. Tsuneyuki, Int. J. Quant. Chem., **91** 211-215 (2003).



## 4 symmetry data セクション

必須のセクションである。ここで指定する対称操作は物体に作用するもので、点群操作の後に並進操作を行うものである。

---

```
# symmetry data
&symmetry
...
/
((rg(i,j,1),i=1,3),j=1,3), (pg(i,1),i=1,3)
((rg(i,j,2),i=1,3),j=1,3), (pg(i,2),i=1,3)
...
```

---

ただし、rg は対称操作の行列要素、pg は対称操作の並進要素である。namelist symmetry の内容は

---

```
symmetry_format,
number_sym_op,
has_inversion,
denom_trans
```

---

symmetry\_format に reciprocal (既定値) を指定すると rg は逆空間の逆格子ベクトルに作用するものになる。

名前の内容は、

	name	comment
	symmetry_format	対称性の入力フォーマットを指示する、既定値'reciprocal'は逆格子ベクトルに対して対称性行列が作用することを指示する。
	number_sym_op	対称性行列の数
d	has_inversion	対称性行列の中に反転対称性が含まれており、それを使った計算の高速化を友好にする場合に 1 を指定。そうでない場合には 0 を指定。デフォルトは 0*。
a	denom_trans	対称操作を指定する際の並進操作のベクトルを指示する際に用いる、基本並進ベクトルの分割数。これを単位にして対称操作の並進ベクトルを整数値で指定する。デフォルト値は 1。
	rg(1:3,1:3,*)	対称操作の $3 \times 3$ 行列部分。整数値をとる。symmetry_format=reciprocal の場合には逆格子に作用する。
	pg(1:3,*)	対称操作の並進部分。整数値をとり、基本並進ベクトルを denom_trans で割ったベクトル単位。対称操作は物体に対して作用し、行列操作ののち並進操作を行う。

である。先頭に a がついているものは設定しなければ自動的に値がセットされる。d がついているものは設定しなければデフォルトで機能が無効になる。(機能を無効にする選択肢に \* をつけている。)

$\text{rg}(:, :, *)$  は対称操作の点群部分を表し、基本逆格子ベクトル  $\mathbf{b}_i$  を用いて、逆格子を整数  $G_1^c, G_2^c, G_3^c$  で

$$\mathbf{G} = (\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3, ) \begin{pmatrix} G_1^c \\ G_2^c \\ G_3^c \end{pmatrix}$$

と表すとき、 $\text{rg}(:, :, *)$  は  $\mathbf{G}^c$  に、 $S^c \mathbf{G}^c$  と働く  $3 \times 3$  の変換行列である。 $S^c$  の各成分は

$$S_{i,j}^c = \text{rg}(i, j, *)$$

で与えられる。また  $\text{rg}(:, :, 1)$  は必ず単位行列でなければならない。

また、 $\text{pg}(:, *)$  は対称操作の並進部分を表すが、その並進ベクトル  $\mathbf{p}$  は

$$\mathbf{p} = (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3) \frac{1}{\text{nnp}} \begin{pmatrix} \text{pg}(1, *) \\ \text{pg}(2, *) \\ \text{pg}(3, *) \end{pmatrix}$$

で与えられる。

逆格子の上での対称操作の行列部分  $S^c$  と実格子 (実空間ではない) の上での対称操作の行列部分  $T^c$  の間には

$$T^c = [(S^c)^t]^{-1} = [(S^c)^{-1}]^t$$

の関係がある。ところで群全体としてみると  $\{S^c\}$  と  $\{(S^c)^{-1}\}$  は同じメンバーで構成されているから  $\{S^c\}$  のメンバー全体は  $\{T^c\}$  の転置行列で得られることが分かる。つまり、実格子の対応関係を追跡することで  $\{T^c\}$  を計算し、これの転置行列を取れば  $\{S^c\}$  を計算できる。

旧形式の入力ファイルとの名前の新旧対応は、

old name	new name	comment
—	symmetry_format	既定値'reciprocal'
ng	number_sym_op	
nsv	has_inversion	
nnp	denom_trans	

である。

## 5 atom data セクション

必須のセクションである。最初の元素数分の行には、1 番目から順に各元素に割り当てる擬ポテンシャルの価電荷  $z_o$  とコア電荷  $z_n$  を指定する。 $z_o$ 、 $z_n$  にそれぞれ 0 を指定するとどのような擬ポテンシャルにも対応する意味となる。これに引き続く原子の数だけの行ではそれぞれユニットセル中の原子位置を指定する。

---

```
# atom data
zo zn
...
atom_kind, pos_a, pos_b, pos_c
...
```

---

ただし、atom\_kind は原子の種類、pos\_a などは原子の位置をセル座標で表したものである。つまり、原子位置  $\mathbf{R}$  は

$$\mathbf{R} = (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3) \begin{pmatrix} \text{pos\_a} \\ \text{pos\_b} \\ \text{pos\_c} \end{pmatrix}$$

で与える。

名前の内容は、

name	comment
zo	元素の価電荷数。自然数ではない特殊な擬ポテンシャルがありえる。0 を与えると価電荷数のチェックは行われない。
zn	元素の全電荷数 = 原子番号。0 を与えると全電荷数のチェックは行われない。
atom_kind	元素の種類の番号。元素番号ではなく、プログラムに与える擬ポテンシャルの順番である。
pos_a, pos_b, pos_c	原子位置を格子座標で与えたもの。

である。

旧形式の入力ファイルとの名前の新旧対応は、

old name	new name	comment
kd	atom_kind	
asi(1)	pos_a	
asi(2)	pos_b	
asi(3)	pos_c	

である。

## 6 k-points data セクション

必須のセクションである。k 点サンプルについて指示する。

---

```
# k-points data
&smpl_kpt
...
/
mmm(1,1),mmm(2,1),mmm(3,1)
mmm(1,2),mmm(2,2),mmm(3,2)
...
```

---

namelist smpl\_kpt の内容は

---

```
dos_mode,
dos_band_lower,
dos_band_upper,
dos_mesh,
bz_mesh,
bz_number_tile,
cutoff_dos_cos,
rmesh_number_shell,
rmesh_range
```

---

である。また、mmm は BZ 内の k 点のタイルを指示する。  
名前の内容は、

name	comment
dos_mode	k 点サンプルに用いる手法。COS なら cos 展開、METHFESSEL_PAXTON なら Methfessel Paxton 法、FERMI なら Fermi 関数を用いる。Methfessel Paxton 法と Fermi 関数を用いている場合、elec_kbt > 0 でなければならない。
dos_band_lower	dos_band_lower 未満のバンドはすべて占有されていると解釈される。設定しなければ 1。
dos_band_upper	dos_band_lower から dos_band_upper までのバンドが部分占有される可能性があるとして解釈され、k 点サンプル手法が適用される。設定しなければ number_band。
dos_mesh(1:3)	k 点サンプル手法が用いる BZ の分割数。必ずしも計算上の k 点のサンプル数とは等しくない。bz_number_tile = 1 の場合のみ指定しなければ自動的に設定される。
bz_mesh	計算上の k 点のサンプル数を決定する k 点のタイルを表すため、BZ は Gamma 点を含む bz_mesh×bz_mesh×bz_mesh の grid に分割される。
bz_number_tile	計算上のサンプル k 点を決めるタイルの種類数

name	comment
cutoff_dos_cos	cos 展開を行う際、cutoff_dos_cos までの長さの実格子を用いて展開する。bz_number_tile = 1 の場合のみ指定しなければ自動的に設定される。
rmesh_number_shell	cos 展開を行う際、実格子点を手動で設定するときの shell の数。bz_number_tile > 1 の時のみ有効。
rmesh_range(1:3)	cos 展開を行う際、実格子を手動で設定するときの格子点の範囲。bz_number_tile > 1 の時のみ有効。
mmm(1:3,1,*)	計算上のサンプル k 点を定めるタイルの起点。(bz_mesh <sup>3</sup> の grid において)
mmm(1:3,2,*)	計算上のサンプル k 点を定めるタイルの間隔。(bz_mesh <sup>3</sup> の grid において)

となっている。

サンプル  $k$  点の決定は以下の順で行われる。

1. 第一ブリュアンゾーンは各基本逆格子ベクトル方向に bz\_mesh 個の区間にそれぞれ格子分割される。ただしできた格子点に  $\Gamma$  点は含まれる。
2. これら格子点をサンプル格子と呼ぶことにする。この格子点の中からサンプル  $k$  点を選出される。
3. タイルの数だけ格子点のマークづけを行う。
  - (a) タイルの番号を  $k$  とする。
  - (b) 拡張ゾーンの中で、サンプル格子を考える。
  - (c) 各基本逆格子の方向について、拡張ゾーンでのサンプル格子点の上で  $\text{mmm}(1:3,1,k)$  から始めて  $\text{mmm}(1:3,2,k)$  飛びに  $\text{mmm}(1:3,1,k)$  以下までの格子点にマークをつけていく。
  - (d) マーク自体は第一ブリュアンゾーンに還元してつける。
4. マークづけされたサンプル格子点を対称操作で移動させて、可能な移動先すべてにもマークをつける。やはり第一ブリュアンゾーンに還元して考える。
5. マークのついたサンプル格子点のうち対称操作について既約なものを選出する。
6. 選出した  $k$  点の位置は等価なもので原点に一番近いものを記録する。(Wigner-Seitz セル) したがって平行 6 面体の第一ブリュアンゾーンからはみ出すものがある。

対称操作とタイルのあり方によっては、単純な格子模様をサンプル  $k$  点がとらないことに注意すること。また、個々のタイルの拡張ゾーンでの大きさは有限であることに注意すること。このため、 $\text{mmm}(1:3,2,*)$  が bz\_mesh を割り切らない場合、不可思議なメッシュが生成される可能性がある。

cos 展開を使っている場合、以下のように smearing が行われる。

1. バンドエネルギー  $e_n(\mathbf{k})$  は  $\mathbf{k}$  について cos 関数で展開される。展開係数の候補は実格子上で cutoff\_dos\_cos まで探索される。

2. 実格子の範囲は、bz\_number\_tile > 1 の時は、rmesh\_number\_shell または rmesh\_range で指定しなければならない。

rmesh\_range で指定する場合、 $|l_1| < \text{rmesh\_range}(1)$ ,  $|l_2| < \text{rmesh\_range}(2)$ ,  $|l_3| < \text{rmesh\_range}(3)$  を満たす格子点  $(l_1, l_2, l_3)$  を含む shell が採択される。

bz\_number\_tile = 1 の時は指定しなくてよく、実格子は自動的に候補の中から選出される。

3. 任意の  $k$  の位置でのバンドエネルギーが計算できるようになる
4. 第一ブリュアンゾーンを dos\_mesh(1:3) で分割した格子点と 2\*dos\_mesh(1:3) で分割した格子点の両方で、補間を用いてバンドエネルギーが計算される
5. 二つのメッシュのそれぞれでバンドエネルギーを四面体法でつないでフェルミ面積分が行われる。
6. Romberg 法でフェルミ面積分の収束が加速される

フェルミ面付近のバンドが単純な振る舞いをする場合、cos 展開で早い収束が得られる。Cu はそのような例である。逆にそうでない場合、計算が不安定になることがある。cos 展開法の計算コストは現状のアルゴリズムの場合、 $k$  点メッシュの数と  $R$  点メッシュの数の両方に比例するため、 $k$  点の濃度の濃い系の場合、かなり大きい。そのため、計算の対象となるバンドを絞り込む機能がついている。

旧形式の入力ファイルとの名前新旧対応は、

old name	new name	comment
–	dos_mode	サンプル手法 (smearing); nd[xyz]>0 なら COS, nd[xyz]=0 なら METHFESSEL_PAXTON, nd[xyz]<0 なら FERMI
nb1	dos_band_lower	
nb2	dos_band_upper	
ndx,ndy,ndz	dos_mesh(1:3)	
nk	bz_mesh	
–	bz_number_tile	サンプルに使うタイルの数
rf	cutoff_dos_cos	
nkrold	rmesh_number_shell	
ll1,ll2,ll3	rmesh_range(1:3)	

である。

## 7 initial charge セクション

初期電荷分布の詳細を指定するオプションのセクションである。

---

```
# initial charge
&initial_charge
mode = 'flip_atomic_charge'
/
flipchr(1)
flipchr(2)
...
flipchr(number_atom)
```

---

または

---

```
# initial charge
&initial_charge
mode = 'direct_atomic_charge'
/
udirchr(1,1) udirchr(2,1) udirchr(3,1)
udirchr(1,2) udirchr(2,2) udirchr(3,2)
udirchr(1,3) udirchr(2,3) udirchr(3,3)
...
flipchr(number_atom)
```

---

namelist initial\_charge の内容は

---

mode

---

である。  
名前の内容は、

name	comment
mode	初期電荷分布の詳細を指定するモードを書く。 flip_atomic_charge と direct_atomic_charge が有効である。
flipchr	各原子ごとに設定する初期スピン電荷密度の扱い。番号は入力での原子の並び順である。0: 原子からの初期スピン電荷密度をそのまま使う、1: 原子からの初期スピン電荷密度を反転してから使う。
udirchr(1:3)	各原子ごとに設定する初期スピンの偏極方向を Cartesian 座標で指定する。すべて 0 を指定すると偏極しない。その他の場合、向きだけが意味を持つように規格化されて扱われる。

となっている。初期スピン電荷の極性を反転しながら定義することで反強磁性体の初期スピン電荷密度分布を作成できる。スピン偏極した原子電荷密度を与えていない場合、このセクションは実質的に意味を持たないので注意すること。



## 8 struct\_opt data セクション

構造最適化を行う cgmrpt において必須のセクションである。

```
# struct_opt data
&struct_opt
...
/
```

namelist struct\_opt の内容は

```
converge_energy,
converge_force,
converge_stress,
search_1d_fratio,
displacement_max,
cell_deform_displ_max,
number_cycle,
refresh_cycle,
search_1d_max_step,
extern_pressure,
stress_scale,
cell_deform,
mode
```

名前の内容は、

	name	comment
a	converge_energy	構造最適化の終了条件の一つ。エネルギー変化の収束。
a	converge_force	構造最適化の終了条件の一つ。力の残差の収束。
a	converge_stress	構造最適化の終了条件の一つ。ストレスと外部圧力の釣り合いの収束。
a	search_1d_fratio	1次元構造最適化の終了条件。力の減少比。対称性などの制約条件によって元々1次元で構造最適化をしている場合には、これを小さくし、1次元構造最適化をきちんとさせると効率よく収束する。
a	displacement_max	原子を動かす最大距離。
a	cell_deform_displ_max	セル変形をその exp で表す行列の各要素の変化量の最大値。
a	number_cycle	1次元構造最適化の繰り返し数。構造最適化を行わず電子状態計算のみ行う場合には0を指定する。デフォルトでは構造最適化が行われる。
a	refresh_cycle	共役勾配法の情報を捨てる周期。
a	search_1d_max_step	1次元構造最適化を行う最大ステップ数。search_1d_fratio を小さくしている場合にはそれに見合うだけ大きくすること。
d	extern_pressure	外部圧力。デフォルトでは0*。

name	comment
d stress_scale(6)	構造最適化時にストレスに対してかける係数。すべて 0* ならセルは固定される。すべて同じ係数ならセルは最適化される。成分の順ははカーテシアン座標で表して $xx, yy, zz, yz, zx, xy$ である。
d cell_deform(6)	セル構造最適化時に最初のセルを lattice_list から変形させるパラメータ。デフォルトではすべて 0*。lattice_list で決まる平面波基底とずらして初期のセル構造を取りたい時に使う。
d mode	構造最適化のモードを選択する。NONE: 通常の最適化 *, HYPER_PLANE: hyper plane constraint 法、FORCE_INVERSION: force inversion 法。

である。先頭に a がついているものは設定しなければ自動的に値がセットされる。d がついているものは設定しなければデフォルトで機能が無効になる。(機能を無効にする選択肢に \* をつけている。)

一次元構造最適化の終了は、力の大きさが構造最適化開始時のその search\_1d\_fratio 倍よりも小さくなることで判断される。通常、構造最適化の終了条件としては converge\_force を使い、converge\_energy は使わない。

converge\_stress は、セルのストレスと外部圧力の釣り合いの収束を指定するもので、

$$\frac{1}{N_{atom}} \left( \frac{dE}{d\epsilon_\nu} - p_{ext} V \right); \quad \text{for } \nu = xx, yy, zz$$

$$\frac{1}{N_{atom}} \left( \frac{dE}{d\epsilon_\nu} \right); \quad \text{for } \nu = yz, zx, xy$$

の許容最大を指定する。

収束の判定において converge\_force と converge\_stress は AND で評価される。一方で converge\_energy はこれらと OR で評価される。

stress\_scale の値は、stress\_scale の 6 成分を系のストレスの 6 成分にそれぞれかけて原子数  $n$  で割ったものが、原子にかかる力と同じ次元として構造最適化の  $3n + 6$  次元超空間での力のベクトル作ることになるつもりで設定すること。

セル構造最適化を行う際の初期の基本格子ベクトルは、対称行列  $c$  を cell\_deform の 6 成分に  $c_{11}, c_{22}, c_{33}, c_{23}, c_{31}, c_{12}$  を対応させて定義すると、

$$\exp(c)\mathbf{a}_1, \exp(c)\mathbf{a}_2, \exp(c)\mathbf{a}_3$$

の三つとなる。

旧形式の入力ファイルとの名前の新旧対応は、

old name	new name	comment
eepsa	converge_energy	scf.converge.energy と共通になっていた
eeps	converge_force	
decr	search_1d_fratio	プログラム上では okatom(1) に対応。
okatom	displacement_max	
ncycl	number_cycle	
nrfr	refresh_cycle	
most	search_1d_max_step	
syspext	extern_pressure	
stscl	stress_scale	

である。

## 9 str\_opt\_constr data セクション

構造最適化を行う cgmprpt において必須のセクションである。構造最適化を行う際に用いる制約条件を指定する。制約条件には、常に働く各原子の力に作用させる逆質量テンソルと、hyper plane constraint 法と force inversion 法の時に用いられる超平面の法線方向との二つがある。

このセクションのフォーマットは以下のとおりであるが、各原子の力に作用させる逆質量テンソルの指定においては、1 番のテンソルは単位行列を既定値とし、テンソルの数はこの 1 番を含めて数える。

---

```
# str_opt_constr data
nmkd
tim(1,1,2),tim(2,1,2),tim(3,1,2)
tim(1,2,2),tim(2,2,2),tim(3,2,2)
tim(1,3,2),tim(2,3,2),tim(3,3,2)
...
nset
imkd nmsi
tاتم(1),...,tاتم(nmsi)
...

vnormal(1,1),vnormal(3,1),vnormal(3,1)
vnormal(1,2),vnormal(3,2),vnormal(3,2)
...
```

---

各原子の逆質量テンソルは一旦 1 番の単位行列で初期化される。ここから始めて、各原子の逆質量テンソルは、あるテンソル imkd を nmsi 個の原子に適用することを順に繰り返すことで設定する。ここで tاتم(1:nmsi) は適用される原子のリストである。nset はこの適用の繰り返し回数である。1 番のテンソルは単位行列で固定されるので他に必要ない場合には tim はすべて省略される。

名前の内容は、

name	comment
nmkd	原子の逆質量テンソルの数。1 番は単位行列で固定されているが、これも含めて数える。
tim(1:3,1:3,*)	原子の逆質量テンソル。2 番以降を指定する関係で、nmkd = 1 の場合、tim の指定はない。
nset	逆質量テンソルを適用するセットの数。デフォルトですべての原子には単位行列がセットされている。
imkd	セットするテンソルの種類。
nmsi	imkd が適用される原子の個数。
tاتم(1:nmsi)	imkd が適用される原子の番号。
vnormal(1:3,*)	hyper plane constraint 法と force inversion 法の時に用いられる超平面の法線方向。セル座標で入力する。また number_atom 行入力する。通常の構造最適化では入力しなくてよい。

---

である。imkd から tatm までの並びは nset 個繰り返される。

この逆質量テンソルは、原子に働く力  $\mathbf{f}$  を基本格子ベクトル単位で表示したもの、

$$\mathbf{f}^d := (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)^{-1} \mathbf{f} = -A^{-1} \frac{dE}{d\mathbf{r}}$$

から変換した力  $\mathbf{F}^d$  を  $F_i^d = \sum_j \text{tim}(\mathbf{i}, \mathbf{j}, *) F_j^d$  で与える。

また、 $\mathbf{v}_i^{n,d} = \text{vnormal}(*, \mathbf{i})$  とし、 $\mathbf{v}_i^n = A \mathbf{v}_i^{n,d}$  としたとき、hyper planne constraint 法では、力場  $\mathbf{f}_i$  は、

$$\sum_i \mathbf{f}_i \cdot \mathbf{v}_i^n = 0$$

を満たすように、 $\mathbf{v}_i^n$  に対してデカルト座標で自然な内積について平行な成分が除去されてから構造最適化に使われる。

同様に force inversion 法では、力場  $\mathbf{f}_i$  は、

$$\sum_i \mathbf{f}_i \cdot \mathbf{v}_i^n$$

の符号が反転するように、 $\mathbf{v}_i^n$  に対して平行な成分が反転されてから構造最適化に使われる。

旧形式の入力ファイルとの名前の新旧対応は、

old name	new name	comment
tim	tim	2 番目から指定
nmkd	nmkd	

となっている。

## 10 trace band data セクション

k 点を線分で追跡するプログラム vbpef と pefcos において必須のセクションである。

---

```
# trace band data
&trace_band
...
/
nkpt(1) ... nkpt(nbk+1)
ak(1,1) ... ak(1,nbk+1)
ak(2,1) ... ak(2,nbk+1)
ak(3,1) ... ak(3,nbk+1)
nkfi(1) ... nkfi(nbk)
rzero(1:3,1),rmin(1),rmax(1),ndiv(1)
...
または
iaxis(1),rmin(1),rmax(1),ndiv(1)
...
```

---

ここで、nbk は線分の個数、nkpt は線分の両端の k 点の名前、ak は k 点の位置を逆格子を単位として与えたもの、nkfi は線分の分割数である。

namelist trace\_band の内容は

---

```
distrib_mode,
output_charge,
output_wave_function,
davidson_flag,
davidson_number_diag,
diag_converge,
distrib_band_lower,
distrib_band_upper,
distrib_number_sphere,
distrib_number_plate,
number_band,
number_band_traced,
number_trace_block
```

---

である。セクションで「または」となっている部分は distrib\_mode=none なら無し、distrib\_mode=plate なら iaxis で始まるもの、distrib\_mode=sphere なら rzero で始まるもの、を指定する。

名前の内容は、

---

name	comment
d distrib_mode	波動関数の状態を調べるモード。none ( なし * ) plate ( 軸平行の板での積分値 ) sphere ( ある位置を中心とした球積分 ) の三種類。

---

name	comment
d output_charge	各 k 点の軌道電荷を出力するなら 1。しないなら 0*。
d output_wave_function	各 k 点の波動関数を出力するなら 1。しないなら 0*。
a davidson_flag	vbpef を実行する際に用いる Davidson 法へのフラグ。
a davidson_number_diag	vbpef を実行する際に用いる Davidson 法の繰り返し数。
a diag_converge	vbpef を実行する際に用いる Davidson 法の固有値収束判定条件。
a distrib_band_lower	波動関数の状態を調べる際のバンドの下限。デフォルトでは 1。
a distrib_band_upper	波動関数の状態を調べる際のバンドの上限。デフォルトでは number_band。
distrib_number_sphere	distrib_mode = sphere の時に指定する。球の数。
distrib_number_plate	distrib_mode = plate の時に指定する。板の方向の数。
a number_band	対角化計算を行うバンドの数。デフォルトは main data セクションで指定した値。k 点の追跡では非占有状態を多く計算したい場合がある。
a number_band_traced	k 点の追跡を行うバンドの数。number_band 以下であること。実際に調べたいバンドの数よりも多めに対角化を行う方が計算が速いことがあるためこのパラメータが存在する。デフォルトでは number_band。
number_trace_block	k 点の追跡を行う線分の数。
nkpt	k 点の追跡を行う線分の両端の k 点の名前。6 文字以内。
ak(1:3,*)	k 点の追跡を行う線分の両端の k 点の座標を基本逆格子ベクトル単位で表したもの。
nkfi	k 点の追跡を行う各線分の分割数。
rzero(1:3)	波動関数の状態を球積分で調べる際の球の中心の座標。
iaxis	波動関数の状態を軸平行の積分で調べる際の軸の番号。
rmin	波動関数の状態を調べる際に行う積分の下限。
rmax	波動関数の状態を調べる際に行う積分の上限。
ndiv	波動関数の状態を調べる際に行う積分の下限か上限までの分割数。

である。先頭に a がついているものは設定しなければ自動的に値がセットされる。d がついているものは設定しなければデフォルトで機能が無効になる。(機能を無効にする選択肢に \* をつけている。)

波動関数を調べるモードが plate の時、指定した座標軸 (複数指定も可) に沿って、原点から設定されたメッシュ点までの擬波動関数のノルム積分が調べられる。

座標軸と積分領域は、iaxis, rmin, rmax, ndiv で与える。これらは結晶座標 (基本格子ベクトルの単位) で指定し、distrib\_number\_plate だけ繰り返す。設定されるメッシュ点  $R_i$  は、

$$R_i = \text{rmin} + (\text{rmax} - \text{rmin}) \times \frac{i}{\text{ndiv}} \quad ; \quad i = 0 \sim \text{ndiv}$$

である。

波動関数を調べるモードが sphere の時、指定した座標点 (複数指定も可) を中心とする適当な半径の球内における擬波動関数のノルム積分が調べられる。

座標点と積分領域は `rzero(1:3)`, `rmin`, `rmax`, `ndiv` で与える。座標点は結晶座標 ( 基本格子ベクトルの単位 ) で指定する。一方、動径変数 `rmin`, `rmax` は原子単位で指定する。これらは `distrib_number_sphere` だけ繰り返す。

設定される動径方向のメッシュ点  $R_i$  は、

$$R_i = rmin + (rmax - rmin) \times \frac{i}{ndiv} \quad ; \quad i = 0 \sim ndiv$$

である。

旧形式の入力ファイルとの名前の新旧対応は、

old name	new name	comment
ifbunp	distrib_mode	ifbunp=0 なら none、ifbunp=1 なら plate、ifbunp=2 なら sphere
ifrho	output_charge	ifrho=1 なら 1
ifrho	output_wave_function	ifrho=2 なら 1
itsb	davidson_flag	
ndiag	davidson_number_diag	
eps	diag_converge	
nbba1	distrib_band_lower	
nbba2	distrib_band_upper	
nsph	distrib_number_sphere	distrib_mode = sphere の時
nsph	distrib_number_plate	distrib_mode = plate の時
nw	number_band	
nb2	number_band_traced	
nbk	number_trace_block	
rzero	rzero	
iaxis	iaxis	
rmin	rmin	
rmax	rmax	
ndiv	ndiv	

となっている。



## 11 inspect wfn data セクション

波動関数を評価するプログラム wfn2chg において必須のセクションである。

---

```
# inspect wfn data
&inspect_wfn
...
/
rzero(1:3,1),rmin(1),rmax(1),ndiv(1)
...
または
iaxis(1),rmin(1),rmax(1),ndiv(1)
...
または
target_as(1:3)
```

---

namelist inspect\_wfn の内容は

---

```
distrib_mode,
output_charge,
distrib_band_lower,
distrib_band_upper,
distrib_number_sphere,
distrib_number_plate,
pdos_target_atom
```

---

である。セクションで「または」となっている部分は

1. distrib\_mode=none なら無し、
2. distrib\_mode=pdos かつ pdos\_target\_atom = 0 なら target\_as を
3. distrib\_mode=pdos かつ pdos\_target\_atom > 0 なら無し
4. distrib\_mode=plate なら iaxis で始まるもの、
5. distrib\_mode=sphere なら rzero で始まるもの、を指定する。

を指定する。

名前の内容は、

---

	name	comment
d	distrib_mode	波動関数の状態を調べるモード。none ( なし * ) \ plate ( 軸平行の板での積分値 ) \ sphere ( ある位置を中心とした球積分 ) \ pdos(projected DOS)、wannier(Wannier 関数) の 5 種類。
d	output_charge	各 k 点の軌道電荷を出力するなら 1。しないなら 0*。
a	distrib_band_lower	波動関数の状態を調べる際のバンドの下限。

---

	name	comment
a	distrib_band_upper	波動関数の状態を調べる際のバンドの上限。
	distrib_number_sphere	distrib_mode = sphere の時に指定する。球の数。
	distrib_number_plate	distrib_mode = plate の時に指定する。板の方向の数。
	pdos_target_atom	distrib_mode = pdos のときに指定する PDOS を計算する原子の番号。ただし番号が 0 の時には、target_asl でセル座標を直接指定する。
	rzero(1:3)	波動関数の状態を球積分で調べる際の球の中心の座標。
	iaxis	波動関数の状態を軸平行の積分で調べる際の軸の番号。
	rmin	波動関数の状態を調べる際に行う積分の下限。
	rmax	波動関数の状態を調べる際に行う積分の上限。
	ndiv	波動関数の状態を調べる際に行う積分の下限か上限までの分割数。
	target_asl(1:3)	projected DOS を原子以外の位置で調べる時の座標 (基本格子ベクトル単位)。

である。先頭に a がついているものは設定しなければ自動的に値がセットされる。d がついているものは設定しなければデフォルトで機能が無効になる。(機能を無効にする選択肢に \* をつけている。)

波動関数を調べるモードが plate の時、指定した座標軸 (複数指定も可) に沿って、原点から設定されたメッシュ点までの擬波動関数のノルム積分を k 点でさらに積分したものが計算される。

座標軸と積分領域は、iaxis, rmin, rmax, ndiv で与える。これらは結晶座標 (基本格子ベクトルの単位) で指定し、distrib\_number\_plate だけ繰り返す。設定されるメッシュ点  $R_i$  は、

$$R_i = rmin + (rmax - rmin) \times \frac{i}{ndiv} \quad ; \quad i = 0 \sim ndiv$$

である。

波動関数を調べるモードが sphere の時、指定した座標点 (複数指定も可) を中心とする適当な半径の球内における擬波動関数のノルム積分を k 点でさらに積分したものが計算される。

座標点と積分領域は rzero(1:3), rmin, rmax, ndiv で与える。座標点は結晶座標 (基本格子ベクトルの単位) で指定する。一方、動径変数 rmin, rmax は原子単位で指定する。これらは distrib\_number\_sphere だけ繰り返す。

設定される動径方向のメッシュ点  $R_i$  は、

$$R_i = rmin + (rmax - rmin) \times \frac{i}{ndiv} \quad ; \quad i = 0 \sim ndiv$$

である。

波動関数を調べるモードが pdos の時、pdos\_target\_atom で指定した番号の原子について論理機番 VBCHRGWAV から読み込んだ動径波動関数に射影した状態密度が計算される。

波動関数を調べるモードが wannier の時、論理機番 NFRECIPWAN から読み込んだ Wannier 関数への状態密度が計算される。

旧形式の入力ファイルとの名前新旧対応は、

old name	new name	comment
ifbunp	distrib_mode	ifbunp=0 <b>なら</b> none、ifbunp=1 <b>なら</b> plate、ifbunp=2 <b>なら</b> sphere、ifbunp=3 <b>なら</b> pdos
ifrho	output_charge	ifrho=1 <b>なら</b> 1
nbba1	distrib_band_lower	
nbba2	distrib_band_upper	
nsph	distrib_number_sphere	distrib_mode = sphere <b>の時</b>
nsph	distrib_number_plate	distrib_mode = plate <b>の時</b>
itwav	pdos_target_atom	
rzero	rzero	
iaxis	iaxis	
rmin	rmin	
rmax	rmax	
ndiv	ndiv	

である。

# 12 stm data セクション

STM をシミュレートするプログラム vbstm において必須のセクションである。

```
# stm data
&stminput
...
/
vs(1)
...
```

配列 vs にはバイアス電圧を与える。  
namelist stminput の内容は

```
number_bias,
stm_fermi_energy
```

である。  
名前の内容は、

name	comment
number_bias	バイアス電圧の数。
stm_fermi_energy	Fermi エネルギーの位置。
vs(1:number_bias)	バイアス電圧。[eV]

である。  
旧形式の入力ファイルとの名前の新旧対応は、

old name	new name	comment
nbias	number_bias	
eferm	stm_fermi_energy	
vs	vs	

である。

## 13 md data セクション

分子動力学のためのセクションである。mdrpt に必須である。

---

```
# md data
&mol_dyn
...
/
mass(1) ... mass(nkd)
cavl(1,1), cavl(2,1), cavl(3,1)
...
```

---

ここで、mass は各原子の質量を原子質量単位で与えたもの、cavl は各原子の初期速度をカーテシアン座標と原子単位系で与えたものである。

namelist mol\_dyn の内容は

---

```
mdmode,
delta_time,
init_md_step,
end_md_step,
mode_xtrap_rho_wfn,
message_cycle,
system_volume,
system_kbt,
system_pressure,
stern_omega_zeta,
stern_omega_eta,
stern_zeta,
stern_eta,
stern_sigma,
brdsn_tauinv,
```

---

である。名前の内容は、

---

	name	comment
a	mdmode	分子動力学のモード。NVE (NVE) \ NVT_BRDSN( Berendsen thermostat による NVT) \ NPT_ST( Stern のアルゴリズム [1] による NPT) \ デフォルトは NVE。
	delta_time	分子動力学の時間ステップ (a.u.)
a	init_md_step	分子動力学の開始ステップ番号。-1 の場合、系の温度からランダムに初期速度を生成する。デフォルトは 0。
a	end_md_step	分子動力学の終了ステップ番号。デフォルトは integer の最大。
a	mode_xtrap_rho_wfn	波動関数と電荷分布の補外方法の指定。0 なら補外なし。1 なら [2,3] によって補外。2 なら [2,3] によって補外する際、原子の電荷分布は原子に追従するとして補外。デフォルトは 2。

---

	name	comment
a	message_cycle	ログ出力間隔。デフォルトは毎回。
d	system_volume	系の初期体積。セルは初期体積になるよう一様等方に拡大縮小される。指定しなければ、メインで指定した体積になる*。
	system_kbt	系の設定温度。 $k_B T$ をエネルギー単位で指定。
a	system_pressure	系の設定圧力。設定しなければ 0。
	stern_omega_zeta	thermostat のパラメタ。[1]
	stern_omega_eta	barostat のパラメタ [1]。0 にすると、体積は固定され、NVT になる。
	stern_zeta	thermostat の初期値
	stern_eta	barostat の初期値
	stern_sigma	積分法の保存量のための初期値
	brdsn_tauinv	Berendsen thermostat の時定数の逆数 $\tau^{-1}$ 。0 にすると NVE になる。
	mass	各原子種の質量 ( a.m.u 単位 )
	cavl(1:3,*)	各原子の初期速度 ( カートesian座標、原子単位系 )

である。先頭に a がついているものは設定しなければ自動的に値がセットされる。d がついているものは設定しなければデフォルトで機能が無効になる。( 機能を無効にする選択肢に \* をつけている。)

Berendsen thermostat[4] においては、毎ステップ速度が

$$\left(1 + \Delta t \tau^{-1} \left( \frac{\sigma}{E_{kin}} - 1 \right)\right)^{1/2}$$

$$\sigma = \frac{3N_{\text{atom}} - 3}{2} k_B T$$

でスケールされる。

名前の新旧対応は、

old name	new name	comment
deltm	delta_time	
imdstp	init_md_step	
emdstp	end_md_step	
imtrw	mode_xtrap_rho_wfn	
msgcycl	message_cycle	
sysvol	system_volume	
syskbt	system_kbt	
syspext	system_pressure	
omzeta	stern_omega_zeta	thermostat のパラメタ
ometa	stern_omega_eta	barostat のパラメタ
zeta	stern_zeta	thermostat
eta	stern_eta	barostat
sigma	stern_sigma	

である。

## 参考

- [1] H.A. Stern, J. Compt. Chem, Vol. 25, No. 5, 749-761 (2004)
- [2] T.A. Arias, M.C. Payne, J.D. Joannopoulos, Phys. Rev. B 45 (1992) 1538
- [3] Dario Alfe, Comp. Phys. Comm., 118 (1999) 31
- [4] DL\_POLY\_4 User Manual, I.T. Todorov and W. Smith

## 14 md aux data セクション

拡張された分子動力学のためのセクションである。分子動力学のコードを拡張する場合その入力データをここに置く。拡張するコードによって入力異なる。

## 15 ESM 法の入力ファイル

esmprm.dat の書式は以下の通りである

```
normal
bc_type
z1
ifix
add_elec
fix_ef
```

ここで各変数の内容は

name	comment
normal	ESM を適用する軸。X(1 番目) または Z(3 番目) を指定可能。
bc_type	境界条件の種類。1,2,3,4 のいずれかを指定。
z1	ESM 電極の位置 $z1$ 。
ifix	1: 電子数一定モード。現状では 1 でなければならない。
add_elec	系に追加する電子の数 (電子数一定モード)。
fix_ef	現状では無効。0.0 を指定。
e0	bc_type = 4 で有効。 $\pm z1$ に位置する導体間の電場勾配。

である。ESM を適用する軸は他の軸に直交していなければならない。

次に ESM 法における境界条件は以下の通りである。まず normal で指示されるセルの垂直軸について、その長さを  $L$ 、垂直軸にそった位置を  $z$  としたとき、

- $z < |L/2|$  までは波動関数  $\neq 0$  で電場も  $\neq 0$
- $|L/2| < z < z1$  までは波動関数  $= 0$  だが電場は  $\neq 0$
- $z > z1$  では波動関数と電場の両方が  $= 0$  (電極が金属だとして)

となっている。そして bc\_type の値に応じて

1. 両サイド真空 vacuum | cell | vacuum (  $\epsilon = 1$  )
2. 両サイド導体 metal | cell | metal (  $\epsilon = \text{無限}$  )
3. 真空と導体 vacuum | cell | metal
4. 両サイド導体 (  $\epsilon = 1$  ) かつ両サイドにポテンシャル差が付けられる。平行平板キャパシタ。

の 4 種類を選択できる。



## 16 wannier data セクション

ワニエ関数のためのセクションである。wannier に必須である。

wannier\_ini\_basis\_mode が 1 (デフォルト) の場合、

---

```
# wannier data
&max_loc_wannier
...
/
lgau(1), mgau(1), alpg(1), taug(1,1), taug(2,1), taug(3,1), cgau(1)
...
B_MAT(1,1), B_MAT(2,1), ..., B_MAT(wannier_number_gaussian,1)
...
B_MAT(1,wannier_number_basis), B_MAT(2,wannier_number_basis), ...
```

---

wannier\_ini\_basis\_mode が 2 の場合、

---

```
# wannier data
&max_loc_wannier
...
/
ngaukd(1)
lgaukd(1), mgaukd(1), alpgkd(1)
...
lgaukd(ngaukd(1)), mgaukd(ngaukd(1)), alpgkd(ngaukd(1))
ngaukd(2)
lgaukd(1), mgaukd(1), alpgkd(1)
...
lgaukd(ngaukd(2)), mgaukd(ngaukd(2)), alpgkd(ngaukd(2))
...

...
ngaukd(number_element)
lgaukd(1), mgaukd(1), alpgkd(1)
...
lgaukd(ngaukd(number_element)), mgaukd(ngaukd(number_element)), alpgkd(ngaukd(number_element))
```

---

wannier\_ini\_basis\_mode が 1 の場合、lgau, mgau, alpg, taug, cgau はワニエ関数計算の initial guess  $\phi_i(\mathbf{r})$  を規定するためのガウシアン  $g_j(\mathbf{r})$  のパラメータで、それぞれ、ガウシアンの軌道角運動量  $l$ 、磁気角運動量  $m$  (ただし xTAPP の実表現の規約に基づく)、軌道指数 ( $e^{-\alpha|\mathbf{r}-\boldsymbol{\tau}|^2}$  における  $\alpha$  で単位は原子単位)、中心位置  $\boldsymbol{\tau}$  (格子座標系)、スピノル成分の番号 (1 または 2) である。cgau を省略すると 1 される。number\_component が 1 の場合 cgau は常に 1 なので省略しても良い。なお、xTAPP の実表現の規約では、

1. s 軌道 ( $l = 1$ ):  $m = 1$

2. p 軌道 ( $l = 2$ ):  $m = (1, 2, 3) = (-y, z, -x)$
3. d 軌道 ( $l = 3$ ):  $m = (1, 2, 3, 4, 5) = (xy, -yz, 3z^2 - 1, -zx, x^2 - y^2)$

である。

Initial guess  $\phi_i(\mathbf{r})$  がそのままガウシアン  $g_j(\mathbf{r})$  に対応する場合 (原子ワニエ軌道を求めたい場合) は上述設定のみでよいが、分子軌道、たとえば最高占有軌道に相当するワニエ関数を求めたい場合、分子ワニエ関数の initial guess は必ずしも一個のガウシアンだけから構築できない。この場合は、付加的な B 行列 B\_MAT を導入して対処する。この場合、initial guess  $\phi_i(\mathbf{r})$  はガウシアンの縮約として表され、縮約係数  $B_{ji}$  を用いて以下のように書かれる:

$$\phi_i(\mathbf{r}) = \sum_j B_{ji} g_j(\mathbf{r}).$$

ここで、B 行列の第一添字  $j$  が、ガウシアンに対応する添字、第二添字  $i$  が合成の結果できる initial guess を表す添字である。デフォルトでは、 $B_{ji}$  は単位行列にセットされており、この場合、一個のガウシアンがそのまま initial guess に対応する。なお B 行列には複素数を書くこともできる。

一方で wannier\_ini\_basis\_mode が 2 の場合、1 とは異なって原子種ごとにワニエ関数計算の initial guess  $\phi_i(\mathbf{r})$  を、各原子核の位置においた単体のガウシアンで設定する。つまり、自動的に B 行列は単位行列として設定される。ngaukd はそれぞれの原子種が持っているガウシアンの数、lgaukd、lgaukd、alpgkd はそれぞれ、ガウシアンの軌道角運動量、磁気角運動量、軌道指数である。また、この場合ワニエ関数の数、ワニエ関数の元となるバンドとエネルギーの範囲も自動設定される。

namelist max\_loc\_wannier の内容は

---

```
wannier_ini_basis_mode
wannier_target_spin
wannier_band_lower
wannier_band_upper
wannier_cell_type
wannier_eng_lower
wannier_eng_upper
wannier_number_gaussian
wannier_target_number
wannier_ident_b_mat
wannier_range_lattice_trans
wannier_number_basis
wannier_threshold_spillage
wannier_threshold_spread
wannier_spread_mix
program_mode
```

---

である。名前の内容は、

	name	comment
a	wannier_ini_basis_mode	ワニエ関数の initial guess を設定するモード。デフォルトは 1。

---

	name	comment
a	wannier_target_spin	ワニエ関数を計算するスピンの番号。デフォルトは 1。
	wannier_band_lower	ワニエ関数の構成に使用するバンドの下限
	wannier_band_upper	ワニエ関数の構成に使用するバンドの上限
	wannier_cell_type	計算セルの形状。1: simple cubic, 2: fcc, 3: bcc, 4: hcp, 5: orthorhombic and tetragonal, 6: monoclinic, 7: triclinic, 8: rhombohedral
	wannier_eng_lower	ワニエ関数を計算するエネルギーの下限
	wannier_eng_upper	ワニエ関数を計算するエネルギーの上限
	wannier_number_gaussian	ワニエ関数の initial guess のガウシアンの数
	wannier_target_number	実空間表示を計算するワニエ関数の番号。モード recp_to_real で必要。
a	wannier_ident_b_mat	ワニエ関数の initial guess を与えるガウシアンの合成係数が自明なら T、それ以外は F。自明でない場合には B_MAT を入力する。デフォルトは T。
	wannier_range_lattice_trans	ワニエ関数によってハミルトニアンに係数を求めるときの格子範囲
a	wannier_number_basis	計算するワニエ軌道の数。未指定の場合 wannier_number_gaussian に等しい。
a	wannier_threshold_spillage	spillage を最小化する時の閾値。デフォルトは $1.0d-4$ 。
a	wannier_threshold_spread	spread を最小化する時の閾値。デフォルトは $1.0d-4$ 。
a	wannier_spread_mix	spread を最小化する際の混合パラメータ。デフォルトは 1.0。
a	program_mode	プログラムの実行モード。デフォルトは generate_rcp。recp_to_real を指定すると、ワニエ関数の実空間表現を計算できる。

である。先頭に a がついているものは設定しなければ自動的に値がセットされる。d がついているものは設定しなければデフォルトで機能が無効になる。(機能を無効にする選択肢に \* をつけている。)

wannier\_cell\_type に関連して、計算セルの形状については制限がある。

- hcp: c 軸は 3 番目の軸であること。a, b 軸のなす角  $\gamma$  は  $120^\circ$  であること。
- monoclinic: a 軸は x 軸と平行、b 軸は y 軸と平行であること。
- triclinic: a 軸は x 軸と平行、b 軸は x, y 平面内であること。